

Lab9 - Magnetic graphene nanoribbons

Simulació de Sistemes Nanomètrics - *Nanociència i Nanotecnologia* - 22/23

Daniel Bedmar Romero 1565494

En aquesta pràctica buscavem recrear els resultats obtinguts per Soon et. al [1] amb l'objectiu de familiaritzar-nos més amb el funcionament del programa SIESTA i la llibreria sisl de Python. El codi empleat per la realització de la pràctica es pot trobar en el meu repositori [2].

1 Dia 1

El primer dia teníem com a objectius crear l'input per a la simulació, pensar en quina direcció necessitàvem samplejar l'espai de les k i fer una simulació amb aquest input per veure que tot anava bé. L'estruatura la podem crear amb el següent comandament de sisl (també plotejem la seva cel·la unitat), de manera que obtenim el que veiem en la Figura 1.

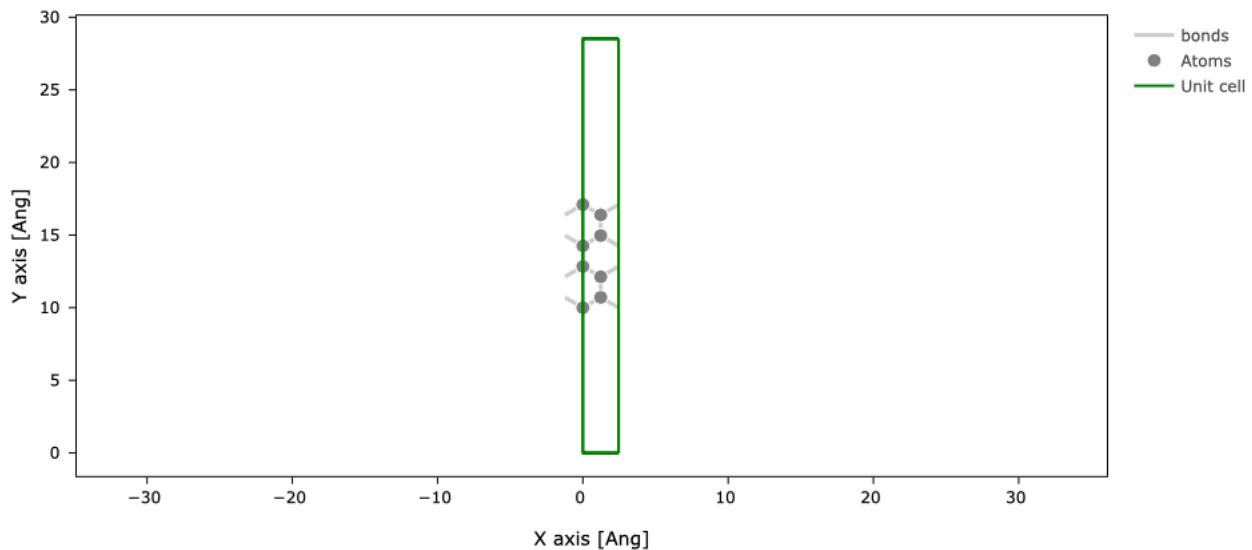


Figure 1

Per crear el fitxer input creem el fitxer *RUN.fdf*, on especifiquen que s'inclougui l'estruatura i un k -grid $10 \times 1 \times 1(x,y,z)$, ja que en la direcció de les x és on volem fer el sampling de l'espai recíproc. En el fitxer input també incloureml que es guardi el Hamiltonià i la densitat electrònica per poder després fer l'estudi de la seva estructura de banda. També caldrà tindre preparat un fitxer amb el pseudopotencial del Carboni.

2 Dia 2

Al plotejar les fatbands veiem que trobem uns estats localitzats al nivell de fermi que no hi haurien de ser, aquests nivells d'energia corresponen als àtoms més exteriors del ribbon. Que apareguin aquests

nivells és degut a que l'estat natural del ribbon té aquests Carbonis saturats d'Hidrogen. Per afegir aquests Hidrogens haurem de modificar la estructura del ribbon generada editant el nostre fitxer *STRUCT.fdf*. En la Figura 2 podem veure com hem modifcat el codi per a poder escriure el fitxer correctament, cal dir que per saber on col·locar els Hidrogens he buscat la distància d'enllaç entre Carboni sp2 i Hidrogen i que també he afegit un fitxer amb el pseudopotencial de l'Hidrogen.

```

open('RUN.fdf', 'w').write("""%include STRUCT.fdf
SystemLabel siesta_2
PAO.BasisSize DZP
MeshCutoff 250. Ry
SaveHS true
SaveRho true
%block kgrid.MonkhorstPack
 10 1 1 0.
 1 1 1 0.
 0 0 1 0.
%endblock
""")
rib.write('STRUCT.fdf')
open('STRUCT.fdf', 'w').write("""LatticeConstant 1.0 Ang
%block LatticeVectors
 2.45951215 0.00000000 0.00000000
 0.00000000 28.52000000 0.00000000
 0.00000000 0.00000000 14.20000000
%endblock LatticeVectors

NumberOfAtoms 10
AtomicCoordinatesFormat Ang
%block AtomicCoordinatesAndAtomicSpecies
 0.00000000 10.00000000 0.00000000 1 # 1: C
 0.00000000 12.84000000 0.00000000 1 # 2: C
 0.00000000 14.26000000 0.00000000 1 # 3: C
 0.00000000 17.10000000 0.00000000 1 # 4: C
 1.22975607 10.71000000 0.00000000 1 # 5: C
 1.22975607 12.13000000 0.00000000 1 # 6: C
 1.22975607 14.97000000 0.00000000 1 # 7: C
 1.22975607 16.39000000 0.00000000 1 # 8: C
 0.00000000 8.91200000 0.00000000 2 # 9: H
 0.00000000 18.18800000 0.00000000 2 # 10: H
%endblock AtomicCoordinatesAndAtomicSpecies

NumberOfSpecies 2
%block ChemicalSpeciesLabel
 1 6 C
 2 1 H
%endblock ChemicalSpeciesLabel
""")

rib.write('STRUCT.fdf')

```

(a)

(b)

Figure 2: En (a) podem veure la versió antiga del codi mentre que en (b) veiem la versió nova.

La diferència entre les estructures de banda les trobem en la Figura 3

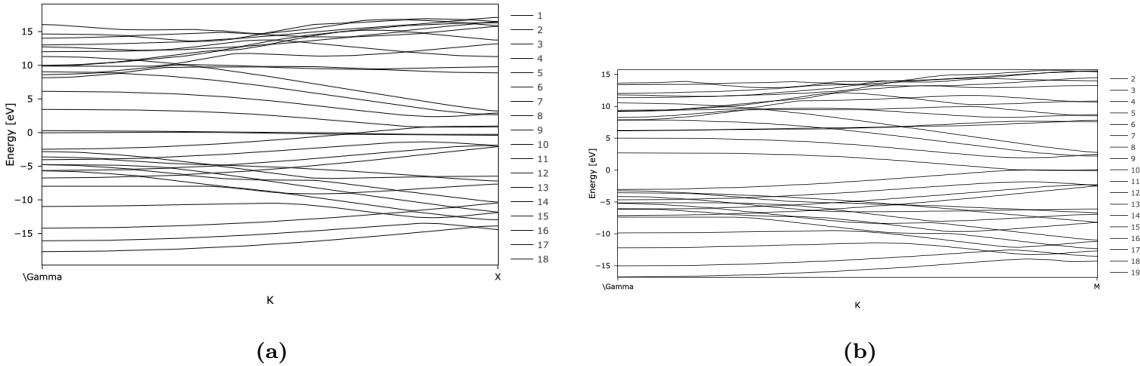


Figure 3: En (a) podem apreciar els estats localitzats en el nivell de Fermi mentre que en (b) aqueests estats ja no hi san gràcies a la saturació amb els Hidrogens

Al afegir-hi la polarització d'spin esperavem que els estats es separassin i, com podem veure en la Figura 4 podem observar com en les Fatbands els estats corresponents a spin Up i spin Down es desdoblen i, en la PDOS també arribem a apreciar aquest *shift* en els nivells. SIESTA ha arribat a una polarització s'pin de 0.44, per tant aquesta polarització neta indica que tenim una configuració ferromagnètica, configuració que no encaixa massa amb l'output.

Per a forçar a SIESTA a que ens dongui la configuració antiferromagnètica forçarem als àtoms 1 i 4 (recordem que son els àtoms més exteriors del ribbon i els quals tenen un paper important en les seves propietats físiques) a tindre spins opossats. Una vegada fet això el nostre sistema acaba tenint una magnetització nul·la i els estats ja no es separen entre SpinUp i SpinDown. Els resultats també es poden veure en la Figura 4

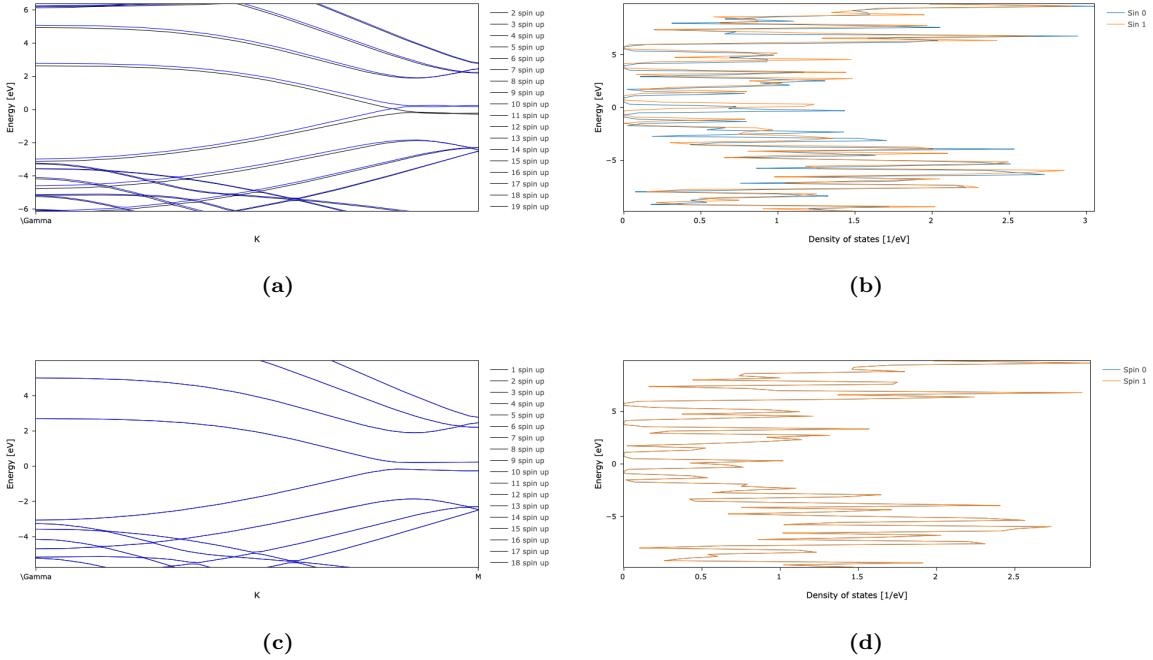


Figure 4: En (a) i (b) les fatbands la PDOS, respectivament, del sistema quan no induïm cap magnetització inicial, en (c) i (d) les fatbands la PDOS, respectivament, del sistema quan induïm la magnetització inicial

3 Dia 3

Una vegada obtingut el sistema que voliem ens falta recrear la Figura 3 (a) i 3 (b) del paper. En la Figura (a) no hi ha camp elèctric i en la (b) sí. La meva recreació d'aquestes figures es poden veure en la Figura 5

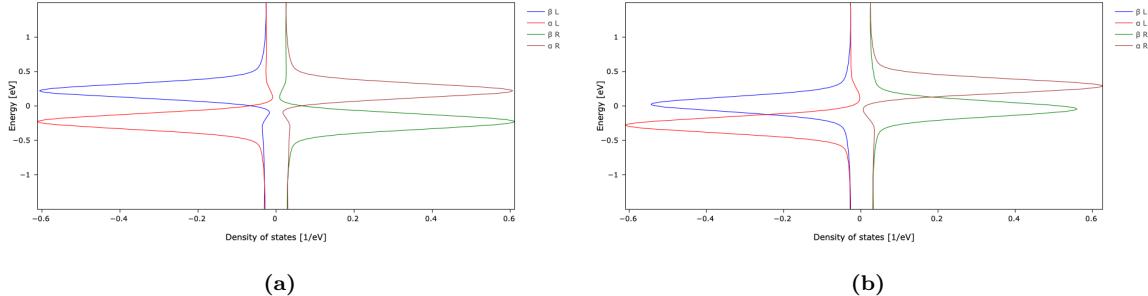


Figure 5: En (a) podem veure com es forma aquesta mena de GAP entre els estats amb spin Up i down, tant a l'esquerra com a la dreta mentre que en (b) tenim clarament estats en el nivell de Fermi, tant a l'esquerra com a la dreta

References

- [1] M. L. C. . S. G. L. Young-Woo Son, “Half-metallic graphene nanoribbons,” *nature*, vol. 444, no. 1, pp. 347—349, 2006.
- [2] “Repositori github.” <https://github.com/DaniBedmar/Lab9>.